

САМООРГАНИЗУЮЩИЕСЯ ДЫРОЧНО-ТРАНСПОРТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ КАК КЛЮЧ К ПОВЫШЕНИЮ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПЕРОВСКИТНЫХ СОЛНЕЧНЫХ БАТАРЕЙ

Сидельцев М.Е.^{1,®}, Агапитова М.М.^{1,2}, Пирязев А.А.^{1,3},
Аккуратов А.В.¹

¹*Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и
медицинской химии РАН*

²*Сколковский институт науки и технологий*

³*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова*
®Sideltsev.max@yandex.ru

Перовскитные солнечные батареи (ПСБ) в настоящее время являются одним из наиболее перспективных классов фотовольтаических устройств для солнечной энергетики. Перовскитоподобные материалы демонстрируют высокие коэффициенты поглощения света, регулируемую ширину запрещённой зоны и возможность низкотемпературной растворной обработки. За последние годы эффективность лабораторных ПСБ достигла значений свыше 26 % [1], что делает данные материалы конкурентоспособными по сравнению с традиционными кремниевыми технологиями.

Важнейшую роль в работе ПСБ играют органические полупроводниковые материалы, формирующие селективные зарядово-транспортные слои. Дырочно-транспортный материал (ДТМ) обеспечивает эффективную экстракцию и транспорт дырок от перовскитного слоя к аноду, снижает рекомбинационные потери и во многом определяет стабильность и долговечность устройства. При этом, эффективность работы ДТМ в большой степени зависит от качества пленки [2]. Неоптимальная морфология пленок ДТМ, к примеру, с шероховатой поверхностью, приводит к образованию дефектов и повышению плотности рекомбинационных центров на границе раздела с перовскитом. Поэтому разработка новых ДТМ с хорошими пленкообразующими свойствами является актуальной задачей современной физической химии и материаловедения.

В рамках настоящей работы предложены новые донорно-акцепторные малые молекулы на основе тиафена, бензотиадиазола и бензола, обладающие способностью к самоорганизации в твёрдом состоянии под действием термической обработки (рисунок 1).

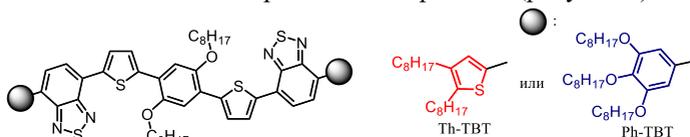


Рисунок 1- Химическая структура малых молекул Th-TBT и Ph-TBT

Было показано, что энергетические уровни ВЗМО новых ДТМ, хорошо согласуются с валентной зоной перовскита MAPbI_3 , что может обеспечить эффективную экстракцию дырок и блокировку переноса электронов (таблица 1).

Таблица 1 – Оптоэлектронные свойства разработанных молекул

ДТМ	$\lambda_{\text{макс}}^{\text{p-p}} / \lambda_{\text{макс}}^{\text{пл}} / \lambda_{\text{край}}^{\text{пл}}$, нм	$E_g^{\text{опт}}$, эВ	ВЗМО/ НСМО, эВ
Th-TBT	530/553/666	1.87	-5.11/-3.58
Ph-TBT	498/570/611	2.03	-5.14/-3.65

Полученные соединения были исследованы в качестве ДТМ в ПСБ p-i-n конфигурации (таблица 2). Показано, что термическая обработка (ТО) значительно повышает КПД работы устройств, в первую очередь за счет повышения фактора заполнения. Это может быть связано с резким уменьшением количества дефектов в объеме ДТМ, а также на границе ДТМ/перовскит за счет изменения морфологии пленки исследуемых материалов.

Таблица 2 – Электрические характеристики ПСБ

ДТМ	V_{oc} , мВ	J_{sc} , $\text{mA}\cdot\text{cm}^{-2}$	FF, %	КПД, %
Th-TBT без ТО	1000,0	21,0	74,1	15,5
Th-TBT после ТО	1000,0	22,6	79,2	17,9
Ph-TBT без ТО	860,0	21,2	36,8	6,7
Ph-TBT после ТО	1040,0	23,1	70,9	17,1

Результаты ДСК-анализа и поляризационной оптической микроскопии (рисунок 2) подтверждают факт реорганизации морфологии пленки под действием термической обработки, что объясняет значительное повышение характеристик ПСБ с прогретыми пленками.

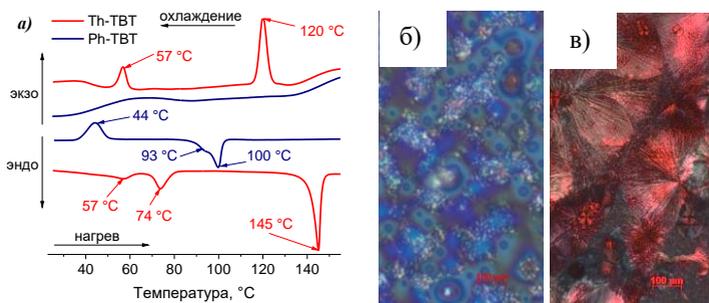


Рисунок 2 – Термограмма ДСК (а) и изображения ПОМ для Rh-TBT до прогрева (б) и после (в)

Таким образом, полученные результаты демонстрируют перспективность подхода, основанного на использовании самоорганизующихся дырочно-транспортных материалов для создания эффективных р–i–n перовскитных солнечных батарей.

Работа выполнена в рамках государственного задания № 125032604426-5.

- [1] Wang D. et al., **2025**, Joule, **9**. 101815
- [2] Ma J. et al., **2021**, Dyes and Pigments, **195**. 109718

Краткая аннотация

В данной работе разработаны два новых донорно-акцепторных ДТМ на основе тиофена, бензотиадиазола и бензола (Th-ТВТ и Ph-ТВТ), обладающие способностью к самоорганизации в твёрдом состоянии под действием термической обработки. Показано, что энергетические уровни разработанных материалов хорошо согласуются с валентной зоной перовскита MAPbI_3 , что обеспечивает эффективную экстракцию дырок. Исследования ПСБ в конфигурации p-i-n продемонстрировали значительное улучшение фотоэлектрических характеристик после термической обработки ДТМ, в первую очередь за счёт увеличения фактора заполнения. Методы ДСК и поляризационной оптической микроскопии подтверждают термоиндуцированную перестройку морфологии плёнок. Полученные результаты демонстрируют перспективность использования самоорганизующихся ДТМ для повышения эффективности перовскитных солнечных батарей.